

## КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ К ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ И СКОРОСТИ РЕАКЦИЙ В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ

© 2005 г. А. Н. Старостин, А. Г. Леонов\*, Ю. В. Петрушевич, Вл. К. Рерих

ГНЦ РФ “Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований”, Россия

\*Московский физико-технический институт (государственный университет), Россия

Поступила в редакцию 19.05.2004 г.

Окончательный вариант получен 18.06.2004 г.

Квантовая механика предсказывает наличие степенных “хвостов” на функции распределения частиц по импульсам в плотных средах даже в условиях термодинамического равновесия. Обобщенные выражения для скоростей реакций пороговых процессов, происходящих с выделением энергии и учитывающие влияние плотности среды на скорости реакций, показывают резкий рост последних из-за квантовых поправок, например для реакций синтеза, химических реакций, скоростей колебательно-поступательной релаксации. Контуры спектральных линий также испытывают изменения при больших отстройках от резонанса из-за модификации функции распределения. Рассматриваются случаи испускания и поглощения излучения и показана асимметрия контура поглощения при отстройках в синюю и красную сторону от центра линии в плотных газовых средах.

### ВВЕДЕНИЕ

Благодаря столкновениям частиц в плотных газах или плазме, описание кинетических процессов должно быть основано на обобщенной функции распределения частиц по энергии и импульсу:  $f(E, \mathbf{p}, r, t)$ , где  $E$  – энергия,  $\mathbf{p}$  – импульс частицы [1]. В случае идеального газа, т.е. при малой плотности среды эта функция распределения имеет в условиях термодинамического равновесия максвелловское распределение по импульсу. Однако для плотной среды столкновения, с учетом конечного времени жизни возбужденных уровней энергии частиц, приводят к резкому увеличению функции распределения в асимптотической области импульсного пространства по сравнению с экспоненциально затухающими максвелловскими функциями. Свой вклад вносит также эффект квантовой неопределенности энергии частиц. В результате в асимптотической области зависимость функции распределения от импульса определяется степенной функцией.

Влияние квантовой неопределенности энергии частиц на функцию их распределения по скоростям было отмечено в 1932 г в [2]. Авторы вычислили исчезающий член разложения функции распределения в ряд по параметру  $\lambda$ . В результате для температуры вводилась поправка, а функция распределения частиц по скоростям остается максвелловской функцией с эффективной температурой:

$$T_{\text{eff}} = T + \frac{\hbar^2}{12m_i T^2} \left\langle \left( \frac{\partial U}{\partial q_i} \right) \right\rangle, \quad (1)$$

где  $U$  – энергия взаимодействия частиц,  $m_i$ ,  $q_i$  – масса и координата частицы  $i$ -го сорта.

Кинетическое уравнение для обобщенной функции распределения частиц во внешнем поле имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}\{f\}. \quad (2)$$

Для решения этого уравнения может быть использовано хорошо известное двухчленной приближение

$$f(E, \mathbf{p}, r, t) = f_0(E, \varepsilon, \mathbf{r}, t) + f_1(E, \varepsilon, \mathbf{r}, t) \frac{\mathbf{p}}{p}. \quad (3)$$

Здесь  $f_0(E, \varepsilon, \mathbf{r}, t)$  – сферическая часть функции распределения, а  $f_1(E, \varepsilon, \mathbf{r}, t)$  описывает слабую анизотропию, связанную с внешней силой, которая, например, при рассмотрении электронов во внешнем электрическом поле определяет плотность тока. Кинетические коэффициенты, такие как скорости дрейфа и коэффициент диффузии, в этом случае вычисляются с использованием сферической части обобщенной функции распределения.

В [1] было использовано представление сферической части обобщенной функции распределения частиц в виде, который позволяет в простейших случаях получить для нее явное выражение:

$$f_0(E, \varepsilon) = \delta_\gamma(E - \varepsilon)n(E). \quad (4)$$

Для идеального газа функция  $\delta_\gamma(E - \varepsilon)$  является  $\delta$ -функцией, а для неидеального имеет вид лоренцевой функции [3, 4]:

$$\delta_\gamma(E - \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma^R(E, \varepsilon)}{(E - \varepsilon - \text{Re} \Sigma^R(E, \varepsilon))^2 + (\text{Im} \Sigma^R(E, \varepsilon))^2}. \quad (5)$$

Здесь  $\varepsilon$  – кинетическая энергия частицы,  $n(E)$  – числа заполнения,  $\Sigma^R(E, \varepsilon)$  – запаздывающий массовый оператор. Таким образом, мнимая часть массового оператора определяет ширину линии лоренцевой функции, а его действительная часть – сдвиг резонанса. В соответствии с этим обозначим:  $\gamma(E, \varepsilon) = \text{Im} \Sigma^R(E, \varepsilon)$ ,  $\Delta(E, \varepsilon) = \text{Re} \Sigma^R(E, \varepsilon)$ , окончательное выражение для этого сомножителя обобщенной функции распределения имеет вид

$$\delta_\gamma(E - \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(E, \varepsilon)}{(E - \varepsilon - \Delta(E, \varepsilon))^2 + \gamma(E, \varepsilon)^2}. \quad (6)$$

Существует определенная связь в поведении крыльев спектральных линий и поведении функции распределения частиц по импульсам “на хвосте”, при больших значениях импульса. Так контур линии определяется сверткой лоренцианов типа (6) и усреднением по скоростям излучающих (поглощающих) атомов. В резонансе энергия частицы является суммой кинетической энергии центра масс и внутренней энергии состояния.

Можно выразить асимптотическое поведение функции распределения по импульсам через мнимую часть запаздывающего массового оператора  $\text{Im} \Sigma^R(E, \mathbf{p}) \equiv \gamma(E, \mathbf{p})$ :

$$f(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma(E, \varepsilon) n(E) dE}{\varepsilon^2 \pi}. \quad (7)$$

Отметим, что в отсутствие внешнего поля функция распределения является сферически симметричной, индекс может быть опущен. Для лоренцева газа электронов в плазме в [4] было получено приближенное выражение

$$\gamma(E, \varepsilon) = \frac{\hbar N \sigma_{\text{tot}}(\varepsilon)}{\varepsilon^2} \sqrt{\frac{2E}{m_e}}. \quad (8)$$

Здесь  $N$  – плотность газа,  $\sigma_{\text{tot}}(\varepsilon)$  – полное сечение рассеяния электрона на атомах (ионах) газа,  $m_e$  – масса электрона. Из (7), (8) с учетом кулоновского взаимодействия частиц можно получить квантовую поправку к функции распределения, обусловленную этим взаимодействием:

$$f(\varepsilon) = \frac{2\hbar N e^4}{\varepsilon^4} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^{\infty} \sqrt{E} n(E) dE. \quad (9)$$

Для неэкранированного кулоновского взаимодействия, как показано в [3],  $f(\mathbf{p}) \sim N/p^8$ . Эффект степенного “хвоста” может заметно сказаться на скорости нерезонансной реакции синтеза. Каче-

ственно эффект отрастания “хвостов” можно понять, если учесть, что за счет взаимодействия частицы с окружением ее пространственное перемещение ограничивается по сравнению со свободной частицей и, вследствие соотношения неопределенностей между координатой и импульсом, ограничение координатного пространства приводит к увеличению объема в импульсном пространстве.

Для контура спектральной линии аналогом эффекта “хвостов” у функции распределения по импульсам является лоренцевская асимптотика на “крыльях” на фоне центрального доплеровского ядра. В то же время, в отличие от чисто классической интерпретации контура спектральной линии, наличие степенного хвоста на функции распределения по импульсам имеет принципиально квантовую природу, так как в классической статистике из-за коммутативности кинетической и потенциальной энергии равновесное распределение частиц остается максвелловским при любой плотности газа.

Для неравновесной функции распределения, обусловленной воздействием внешней силы, эффект степенной зависимости в асимптотической области остается справедливым для ее сферической части, но с измененными показателями степени. Наряду с изменением скорости реакций, как и для равновесной функции, это приводит к изменению также кинетических коэффициентов, определяющих перенос. Числа заполнения неравновесной функции распределения должны вычисляться в соответствии с конкретными условиями задачи.

Спектральная плотность излучения определяется функцией распределения фотонов по частотам. В условиях низких температур, когда эквивалентная ширина линии превышает температуру:  $\Delta\omega_{\text{экв}} \geq T$ , ее форма заметно отличается от формулы Планка, а интенсивность излучения может значительно превышать величину, рассчитанную по этой формуле. В [5, 6] теоретически и экспериментально исследовались процессы переноса резонансного излучения в плотных газовых средах. Были получены уравнения переноса резонансного излучения [5], в которых фигурировала обобщенная спектральная плотность излучения  $J(\omega, \mathbf{k})$ , зависящая от частоты  $\omega$  и волнового вектора  $\mathbf{k}$ , являющихся независимыми переменными.

При высоких давлениях стандартная теория переноса резонансного излучения, развитая для случая низких газовых плотностей, становится неприменимой, поскольку перестает выполняться условие малого отличия величины диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  от единицы, а длина свободного пробега фотона сравнивается с длиной волны излучения. Необходимость модификации теории возникает в условиях, когда длина пробега фотона по отношению к поглощению в центре

резонансной линии сравнивается с длиной волны излучения, что для паров натрия имеет место при плотности газа  $N \geq 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Как легко показать, в плотной среде фотон оказывается “плохой” квазичастицей и для него не выполняется дисперсионное соотношение  $(\epsilon')^{1/2}\omega = ck$ , где  $c$  – скорость света,  $k$  – волновое число. В этом случае задача о переносе резонансного излучения может быть решена с использованием уравнения для фурье-компонент корреляционных функций электромагнитного поля, которое можно сформулировать на языке кинетических функций Грина. Это позволяет ввести обобщенную спектральную “интенсивность” излучения  $J(\omega, \mathbf{k})$ , в которой частота  $\omega$  и волновой вектор  $\mathbf{k}$  являются независимыми переменными. В общем случае функция  $J(\omega, \mathbf{k})$  не является положительной и физический смысл имеют некоторые ее моменты, т.е. интегралы по  $k$  с различными весовыми функциями. Так, спектральная интенсивность излучения  $J_\omega$ , с которой обычно имеют дело в измерениях и в стандартной теории переноса, связана с  $J(\omega, \mathbf{k})$  соотношением

$$J_\omega(\Omega) = \frac{2c^2}{\omega} \int_0^\infty k J(\omega, \mathbf{k}) \frac{k^2 dk}{(2\pi)^5}, \quad (10)$$

где  $\Omega$  – единичный вектор в направлении  $\mathbf{k}$ .

Из развитой теории следует, что в центре линии остаточная интенсивность выходящего из неоднородно-нагретой среды излучения на много порядков величины превышает интенсивность излучения, полученную в стандартной теории переноса резонансного излучения. Другим следствием, вытекающим из развитой обобщенной теории переноса, является возможность получения в определенных условиях аномально высокой интенсивности излучения на далеком красном крыле спектральной линии, который определяется спектральным больцмановским фактором, возникающим в выражении для интенсивности спонтанного излучения термодинамически равновесной среды.

### 1. СКОРОСТИ РЕАКЦИЙ

Скорости нерезонансных реакций, в частности реакций синтеза, определяется энергией взаимодействующих частиц в системе центра масс. При не слишком высокой температуре, как отмечалось в [7], основной вклад в реакции синтеза будут давать частицы с энергией в несколько раз превышающей температуру плазмы.

В последнее время экспериментально обнаружен [8, 9] эффект значительного отклонения от предсказанной теорией зависимости скорости нерезонансной реакции синтеза от энергии частиц в области низких энергий. График зависимости ас-

трофизического фактора в сечении реакции синтеза, полученный в экспериментах с пучком дейтронов, взаимодействующим с дейтронами, внедренными в кристаллическую решетку металла мишени, представленный в [8], показан на рис. 1. Оказалось, что скорость реакции в области малых энергий пучка частиц ( $< 5 \text{ кэВ}$ ) значительно больше предсказанной величины. Для объяснения такого эффекта предлагалась гипотеза экранировки ионов облаком электронов [8]. На рис. 1 приведены полученные в этой работе теоретические зависимости астрофизического фактора реакции для неэкранированных ядер дейтерия и экранированных ядер с различным значениями потенциала экранировки. При потенциале 28 эВ, реально возможной величины для рассматриваемых условий, теоретическая кривая плохо согласуется с экспериментом. Как видно, согласие с экспериментальными зависимостями скорости реакции в области малых энергий пучка может быть получено лишь для экранирующего потенциала 309 эВ, нереальной величины в условиях эксперимента. Очевидно возникшие проблемы в интерпретации экспериментов приводят к необходимости уточнения используемых теоретических моделей.

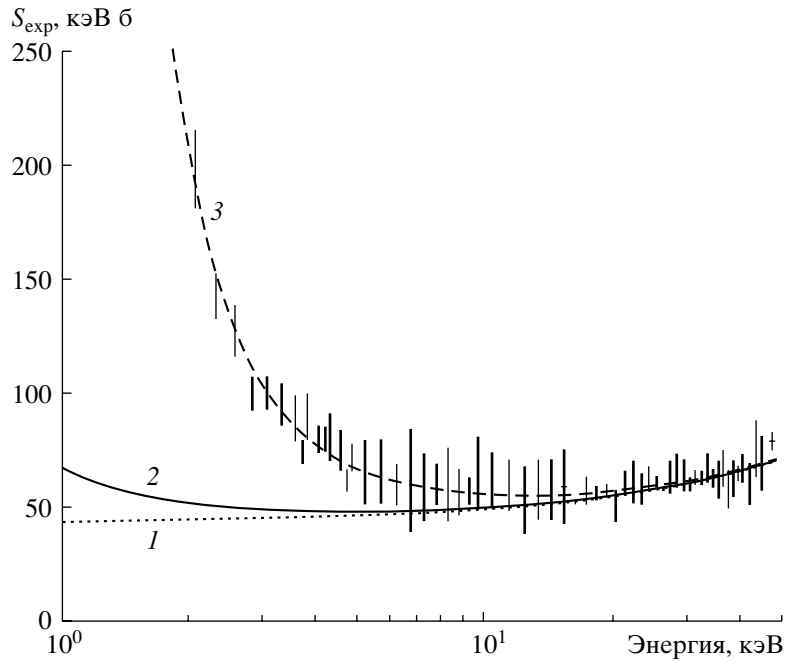
В [4, 10] показано заметное отклонение функции распределения от максвелловского вида, связанное с учетом квантовых поправок. Это приводит к степенному затуханию функции распределения, что влияет на скорости реакций этих частиц, в частности, к неэкспоненциальной температурной зависимости сечений реакции неупругих процессов.

В настоящей работе было проведено моделирование реакций синтеза с учетом влияния этого механизма на функцию распределения в реальных экспериментальных условиях, и вычислены скорости реакций взаимодействия пучка частиц и мишени, экспериментально измеренные в [8, 9].

Скорость реакции частиц сортов  $a$  и  $b$  может быть получена из интеграла столкновений в уравнении (2) и сводится в самом общем виде к вычислению

$$\begin{aligned} n_a n_b K = & C \int_0^\infty dE_a \int d\mathbf{p}_a \int_0^\infty dE_b \int d\mathbf{p}_b \int d\omega \int dq q^2 n(E_a) \times \\ & \times (1 \mp n(E'_a)) \delta\gamma_a(E_a - \epsilon_a, \epsilon_a) n(E_b) (1 \mp n(E'_b)) \times \\ & \times \delta\gamma_b(E_b - \epsilon_b, \epsilon_b) \delta\gamma'_a(E'_a - \epsilon_{p_a - q}, \epsilon_{p_a - q}) \times \\ & \times \delta\gamma'_b(E'_b - \epsilon_{p_b + q}, \epsilon_{p_b + q}) \sigma(\epsilon_p) \sqrt{\frac{2\epsilon_p}{\mu}}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $E_a, p_a$  – энергия и импульс соответственно частицы сорта  $a$ ,  $E'_a = E_a + Q_a - \omega$ ,  $E'_b = E_b + \omega + Q_b$ ,  $\epsilon_p$  – кинетическая энергия частиц в системе цент-



**Рис. 1.** Зависимость астрофизического фактора в сечении реакции синтеза дейтронов от энергии (в системе центра масс) частиц пучка. Приведены экспериментальные значения и теоретические зависимости для незранированных ядер дейтерия (1) и ядер экранированных свободными электронами металла мишени (2 –  $U_e = 28$  эВ, 3 –  $U_e = 309$  эВ). Рисунок из работы [8].

ра масс,  $\mu$  – приведенная масса сталкивающихся частиц,  $C$  – нормировочная константа, которая находится из сравнения с расчетами при малой плотности и высокой температуре,

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2\mu}, \quad \mathbf{p} = \frac{m_b \mathbf{p}_a - m_a \mathbf{p}_b}{m_a + m_b}.$$

Верхний знак в (11) относится к фермионам, нижний – к бозонам.

Для эндотермических реакций ( $Q_a < 0$ ) сомножители ( $1 \mp n(E')$ ) экспоненциально малы. Последнее обстоятельство означает, что описываемый здесь механизм ускорения реакций синтеза за счет наличия степенных хвостов, предполагает, что температура плазмы не может быть слишком низкой, так как сталкивающиеся частицы являются уже ионизованными, а скорость ионизации является экспоненциальной функцией температуры. В твердотельной матрице ионизация имеет место вследствие наличия электронов проводимости.

Для реакций с энергосвободением ( $Q_a > 0$ ) в невырожденном случае величиной  $n(E')$  можно пренебречь по сравнению с единицей. Выражение для чисел заполнения частиц  $n(E)$  зависит от статистики системы, для рассматриваемой задачи реакции дейтронов справедлива статистика Бозе:

$$n(E) = [\exp\{(E - \mu)/T\} - 1]^{-1}. \quad (12)$$

Для неидеальной плазмы зависимость функции распределения от кинетической энергии  $\varepsilon$  определяется лоренцианом:

$$\delta\gamma(E - \varepsilon, \varepsilon) = \frac{\gamma(E, \varepsilon)/\pi}{(E - \varepsilon - \Delta(E, \varepsilon))^2 + \gamma^2}. \quad (13)$$

Ширина линии определяется соотношением [10]

$$\gamma_a(E_a, \varepsilon_a) = \hbar N \sigma_a V_a, \quad \sigma_a = \frac{\pi e^4}{\varepsilon_a^2}, \quad V_a = \sqrt{\frac{2\varepsilon_a}{m_a}}, \quad (14)$$

где  $N$  – концентрация рассеивателей.

В условиях, в которых плазма становится идеальной, например, при уменьшении ее плотности, параметр  $\gamma(E, \varepsilon) \rightarrow 0$ , в этом случае функция  $\delta\gamma(E - \varepsilon, \varepsilon)$  стремится к  $\delta$ -функции.

Зависимость сечения реакции от кинетической энергии в системе центра масс  $\varepsilon_p$  может быть представлена в виде

$$\sigma_1(\varepsilon_p) = \frac{S(\varepsilon_p)}{\varepsilon_p} \exp\{-2\pi\eta(\varepsilon_p)\}, \quad (15)$$

где  $\eta(\varepsilon_p) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}$  – параметр Зоммерфельда. Величина астрофизического фактора  $S(\varepsilon_p)$  незначительно изменяется с энергией. Влияние на сечение реакции потенциала  $U_e$ , который возникает в результате экранировки атома электронами,

Таблица 1

$E_b$ , кэВ	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$K$	$K/K_1$
15	$4.38 \times 10^4$	$4.045 \times 10^4$	$7.393 \times 10^4$	$4.38 \times 10^4$	$1.00 \times 10^0$
10	$4.073 \times 10^3$	$3.762 \times 10^3$	$6.877 \times 10^3$	$4.11 \times 10^3$	$1.01 \times 10^0$
5	$1.711 \times 10^1$	$1.580 \times 10^1$	$2.892 \times 10^1$	$1.77 \times 10^1$	$1.03 \times 10^0$
2	$2.615 \times 10^{-4}$	$2.421 \times 10^{-4}$	$4.487 \times 10^{-4}$	$2.85 \times 10^{-4}$	$1.09 \times 10^0$
1.8	$5.038 \times 10^{-5}$	$7.223 \times 10^{-5}$	$1.344 \times 10^{-4}$	$5.62 \times 10^{-5}$	$1.12 \times 10^0$
1.5	$2.339 \times 10^{-6}$	$3.850 \times 10^{-6}$	$7.343 \times 10^{-6}$	$3.34 \times 10^{-6}$	$1.43 \times 10^0$
1.2	$3.613 \times 10^{-8}$	$7.474 \times 10^{-8}$	$2.265 \times 10^{-7}$	$7.84 \times 10^{-7}$	$2.17 \times 10^1$
1	$8.252 \times 10^{-10}$	$7.711 \times 10^{-10}$	$5.678 \times 10^{-8}$	$2.82 \times 10^{-7}$	$3.42 \times 10^2$

можно учесть прибавлением его к энергии столкновения:

$$\sigma(\epsilon_p) = \sigma_1(\epsilon_p + U_e). \quad (16)$$

Были проведены численные расчеты скоростей реакций в соответствии с представленной моделью. Задавались условия, близкие к экспериментальным: концентрация частиц  $n_a = 5 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}$ , массы взаимодействующих частиц  $m_a = m_b = 2 \text{ а.е.м.}$ , рассматривалась реакция частиц сорта  $a$  и падающего пучка частиц сорта  $b$ . В качестве  $N$  в выражении для ширины (14) бралась концентрация рассеивающих ионов в металлической матрице.

Учитывая высокую размерность интеграла (11), для его вычисления применялся метод Монте-Карло. Распределение частиц по кинетической энергии задавалось для температуры частиц  $T = 2.44 \times 10^{-2} \text{ эВ}$ , кроме того, задавалась энергия пучка частиц сорта  $b$ .

Следует отметить, что для пучка моноэнергетических частиц вычисление скорости реакции по формуле (11) может быть сведено к более простому интегралу

$$n_a K' = \int_0^\infty dE_a \int d\mathbf{p}_a \int n(E_a) a(E_a - \epsilon_a, \epsilon_a) \sqrt{\frac{2\epsilon_p}{\mu}} \sigma(\epsilon_p), \quad (17)$$

где  $a(E - \epsilon, \epsilon)$  означает лоренциан (13). В рамках этой модели для случая идеальной плазмы, когда при интегрировании влиянием области крыльев лоренцевской функции можно пренебречь, выражение для скорости реакции упрощается:

$$n_a K_2 = C \int_0^\infty dE_a \int d\mathbf{p}_a \int n(E_a) \delta(E_a - \epsilon_a) \sqrt{\frac{2\epsilon_p}{\mu}} \sigma(\epsilon_p) \sim \int_0^\infty d\epsilon_a n(\epsilon_a) \epsilon_p \sigma(\epsilon_p). \quad (18)$$

Сравнение результатов расчетов по формуле (18) с вычислением интеграла (11) характеризует влияние крыльев распределения на величину сечения реакции. Кроме того, эти результаты могут быть также сопоставлены с вычислением скорости реакции по формуле  $K_1 = \sigma v$  с использованием формулы (15), что позволит оценить фактор  $S(\epsilon_p)$  и отклонение теоретических предсказаний от эксперимента.

Для того чтобы оценить влияние крыльев распределения на величину скорости реакции (17), необходимо учесть отклонение функции распределения от максвелловского вида, связанное с конечностью ширины функции распределения по импульсу. Как показано в [4], в результате учета квантовых поправок функция распределения по кинетической энергии в асимптотическом пределе содержит степенную зависимость:

$$f(\epsilon) = C' \int_0^\infty dE_a n(E_a) a(E_a - \epsilon_a, \epsilon_a) \sim \exp\left\{-\frac{\epsilon_a}{T}\right\} + \frac{C_a(T)}{\epsilon_p^4}. \quad (19)$$

Используя это разложение в (17), можно вычислить скорость реакции, учитывая немаксвелловость функции распределения частиц по кинетической энергии:

$$K_3 = C_3 \int_0^\infty d\epsilon_a f(\epsilon_a) \sqrt{\frac{2\epsilon_a \epsilon_p}{\mu}} \sigma(\epsilon_p). \quad (20)$$

Результаты таких расчетов приведены в табл. 1.

Данные, приведенные в этой таблице, позволяют сделать вывод, что скорости реакции, вычисленные по разным моделям, хорошо совпадают для энергий пучка выше 2 кэВ, а при ее уменьшении в диапазоне от 2 кэВ до 1 кэВ, остаются близки величины  $K_1$  и  $K_2$ , но скорость реакции  $K$  оказывается значительно больше этих величин. Кроме того, следует отметить удовлетворитель-

Таблица 2

$E_b$ , кэВ	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$K_3/K_1$
15	$4.474 \times 10^4$	$4.133 \times 10^4$	$7.552 \times 10^4$	1.6879937
10	$4.237 \times 10^3$	$3.914 \times 10^3$	$7.152 \times 10^3$	1.6880552
5	$1.911 \times 10^1$	$1.766 \times 10^1$	$3.232 \times 10^1$	1.69143
2	$4.059 \times 10^{-4}$	$5.370 \times 10^{-4}$	$9.931 \times 10^{-4}$	2.4466201
1.8	$8.433 \times 10^{-5}$	$1.184 \times 10^{-4}$	$2.197 \times 10^{-4}$	2.6056397
1.5	$4.605 \times 10^{-6}$	$7.336 \times 10^{-6}$	$1.383 \times 10^{-5}$	3.0034846
1.2	$9.315 \times 10^{-8}$	$1.819 \times 10^{-7}$	$4.320 \times 10^{-7}$	4.6383085
1	$2.863 \times 10^{-9}$	$6.951 \times 10^{-9}$	$7.386 \times 10^{-8}$	25.801192

ное согласие величин  $K_3$  и  $K$ . Таким образом, можно сделать вывод, что для оценки скорости реакций вполне применима методика представленной формулой (17). Результаты этих расчетов свидетельствуют о значительном вкладе “хвостов” распределения по импульсам при вычислении скорости реакции. В последнем столбце таблицы приведена величина, характеризующая отклонение скорости реакции  $K$  от величины, которая может быть получена в идеальной плазме.

Представляет интерес учет также влияния экранировки атомов на скорость реакции и сравнение рассмотренных механизмов. С этой целью были проведены расчеты в рамках предложенной модели, но при экранирующем потенциале  $U_e = 28$  эВ, влияние которого учитывалось в соответствии с (16). Такая величина потенциала вполне реалистична для условий проводимых экспериментов [8]. Результаты расчетов представлены в табл. 2.

В этих расчетах не проводилось моделирование по полной модели (11), так как достаточно точную оценку можно получить в рамках модели (17). Результаты свидетельствуют о слабом влиянии экранирующего потенциала при его реалистичной величине, что согласуется с результатами [8, 9]. В то же время, как и в предыдущих расчетах, учет квантовых поправок резко увеличивает теоретически предсказанную величину скорости реакции в области малых энергий пучка: 1–2 кэВ.

## 2. ДЕТАЛЬНЫЙ БАЛАНС ПОГЛОЩЕНИЯ И ИСПУСКАНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Рассмотренные во Введении эксперименты по взаимодействию излучения со средой и наблюдаемые эффекты, которые не могли быть получены в рамках стандартной теории переноса резонансного излучения [11], могут в значительной мере проявиться при наблюдении теплового излучения, выходящего из плотной среды. Расчет интенсивности такого излучения также должен

быть выполнен с использованием введенной ранее функции  $J(\omega, k, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r})$ . В стационарном случае обобщенная спектральная интенсивность излучения  $J(\omega, k, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r})$  должна удовлетворять одновременно двум условиям. Одно из них имеет вид кинетического уравнения

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla J = -k_\omega J + \tilde{\epsilon}(\omega, k, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}), \quad (21)$$

где  $k_\omega$  – коэффициент поглощения, а  $\tilde{\epsilon}$  – обобщенная спектральная интенсивность объемного спонтанного испускания:

$$k_\omega = \frac{\omega^2 \epsilon''(\omega, k)}{c^2 k} = \frac{4}{3} (g_2/g_1) \frac{(\pi d \omega)^2}{\hbar c^2 k} a(\omega, k) \times \{ \tilde{N}_1 - (g_1/g_2) \tilde{N}_2 \exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T] \}, \quad (22)$$

$$\tilde{\epsilon} = \frac{4d^2 \omega^3 \hbar \omega}{3 \hbar c^2 k} \frac{\omega^2 \epsilon''}{|\omega^2 \epsilon - c^2 k^2|^2} (2\pi)^3 a(\omega, k) \tilde{N}_2 \times \exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T]. \quad (23)$$

В (22) и (23)  $a(\omega, k)$  – обобщенный контур линии;  $T$  – температура равновесной среды в энергетических единицах;  $g_{1,2}$  – статистический вес основного и возбужденного уровней,  $\tilde{N}_{1,2}$  – их эффективные населенности, которые в равновесии подчиняются соотношениям Больцмана, а в отсутствие его могут быть найдены из уравнений кинетики, приведенных в [5]; величина  $d$  – матричный элемент оператора дипольного момента для перехода 2–1.

Проинтегрировав (23) по  $k$  в пренебрежении пространственной дисперсией (при этом  $a(\omega, k) \approx a(\omega)$ ,  $\int a(\omega) d\omega = 1$ ), можно получить наглядное выражение для спектральной интенсивности спонтанного излучения в сильнопоглощающей среде:

$$\varepsilon_\omega = (1/4\pi)\hbar\omega A_0 \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^3 \operatorname{Re}(\sqrt{\varepsilon}) a(\omega) \tilde{N}_2 \times \exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T], \quad (24)$$

где  $A_0$  – вероятность спонтанного излучения в вакууме.

Из уравнения (21) следует, что в общем случае для спектральной интенсивности  $J_\omega$ , определенной в (10), не существует замкнутого уравнения и кроме уравнения в частных производных первого порядка (21), функция  $J(\omega, k, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r})$  должна удовлетворять также неоднородному волновому уравнению, которое в стационарном случае имеет вид

$$\left[-\frac{c^2}{2}\Delta + 2(c^2k^2 - \omega^2\varepsilon')\right]J = \frac{8\pi\hbar\omega^4\varepsilon''}{|\omega^2\varepsilon - c^2k^2|^2} \times \frac{2(c^2k^2 - \omega^2\varepsilon')}{\{(N_1/N_2)(g_2/g_1)\exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T] - 1\}}. \quad (25)$$

Для замыкания системы уравнений (21), (25) необходимо дополнить их уравнениями для населенностей  $N_i$ . В пределе  $N_2 \ll N_1 \approx N$  для  $N_2$  можно получить следующее уравнение (с учетом того, что в плотной среде имеет место режим ППЧ – полного перераспределения по частотам):

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3}\frac{d}{\hbar^2} \frac{g_2}{g_1} \int \frac{d\omega d\mathbf{\Omega} k^2 dk}{(2\pi)^3} J(\omega, k, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}) a(\omega, k) \tilde{N}_1 - \\ & - \frac{8d^2}{3\hbar} \int \frac{d\omega k^2 dk}{\pi} \frac{\omega^4 \varepsilon''(\omega, k)}{|\omega^2 \varepsilon - c^2 k^2|^2} a(\omega, k) \times \\ & \times \exp\left(-\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{T}\right) \tilde{N}_2 - \\ & - W\left(\tilde{N}_2 - \tilde{N}_1 \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right)\right) = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Первый член в уравнении (26) соответствует фотопоглощению излучения, второй спонтанному распаду возбужденных атомов, третий столкновительному обмену между состояниями 1 и 2 с вероятностью  $W$ .

Появление в (22)–(26) экспоненциального множителя  $\exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T]$  связано с обобщением стандартной теории переноса излучения [12, 13] на случай широких линий, характерных для плотной среды, и строго обосновано в [5] в рамках теории Л.В. Келдыша с использованием кинетических функций Грина [14, 15].

Как было показано в [5], спектральная по частоте и углам интенсивность спонтанного излучения  $\varepsilon_\omega$  (полученная интегрированием по волно-

вым векторам  $\mathbf{k}$  уравнений переноса излучения [5]) может быть записана в следующем виде:

$$\varepsilon_\omega = \frac{1}{4\pi} \hbar\omega A_0 \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^3 n_\omega \tilde{N}_2(\omega), \quad (27)$$

$A_0$  – вероятность спонтанного излучения в вакууме,  $n_\omega$  – показатель преломления резонансной среды,  $n_\omega = \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon_\omega}$ , где  $\varepsilon_\omega$  – диэлектрическая проницаемость (выражение (25) получено в [5] в пренебрежении пространственной дисперсией).  $\tilde{N}_2(\omega)$  – эффективная спектральная заселенность верхнего уровня:

$$\tilde{N}_2(\omega) = \tilde{N}_2 a(\omega) \exp[-\hbar(\omega - \omega_0)/T]. \quad (28)$$

В выражении (28)  $T$  – температура равновесной среды в энергетических единицах,  $a(\omega)$  – профиль спектральной линии ( $\int a(\omega) d\omega = 1$ ),  $\tilde{N}_2$  – эффективная населенность возбужденного состояния. В равновесии из (27) и (28) получим спектральное больцмановское распределение:

$$\tilde{N}_2(\omega) = \frac{g_2}{g_1} N_1 a(\omega) \exp[-\hbar\omega/T]. \quad (29)$$

Здесь  $g_i$  – статистический вес  $i$ -го состояния ( $i = 1, 2$  для двухуровневого атома),  $N_1$  – полная заселенность нижнего состояния. Отметим, что выражение типа (28) для разреженной среды приводилось ранее в [16] из соображений детального баланса, требующего чтобы в равновесии спектральная интенсивность излучения совпадала с планковским выражением:

$$J_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \frac{1}{\exp[\hbar\omega/T] - 1}, \quad (30)$$

в котором фигурирует “текущая” частота  $\omega$ . В стандартной теории переноса из детального баланса следует выражение (8) с фиксированной частотой перехода  $\omega_0$ . Для случая больших отстройек от резонанса  $\Lambda = \omega - \omega_0$ ,  $\Lambda \approx T$ , выражения (28), (29) заметно отличаются от соответствующих выражений, используемых в стандартной теории переноса резонансного излучения [17, 12, 18].

Наиболее наглядный вывод выражений типа (28) был получен после публикаций [5, 6] Ричардом Мором (частное сообщение), который рассмотрел баланс испускания и поглощения движущимся атомом и учел законы сохранения энергии и импульса излучающих и поглощающих атомов с учетом их кинетической энергии, различной в основном и возбужденном состояниях (по существу это соответствует учету эффекта Доплера).

Адекватным аппаратом для описания переноса резонансного излучения в плотных средах яв-

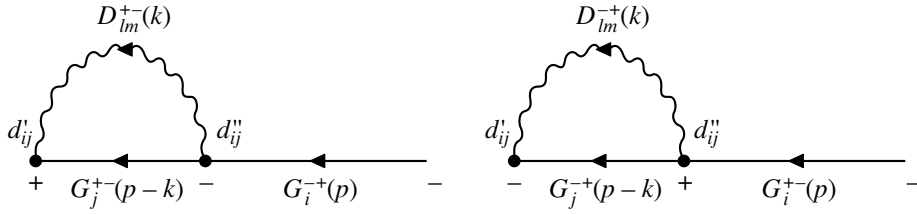


Рис. 2. Диаграммы процессов испускания и поглощения излучения атомом.

ляется аппарат неравновесных функций Грина, развитый в [14] и примененный для рассматриваемых задач в [5].

Рассмотрим диаграмму рис. 2 в технике Келдыша для процесса испускания атомом в состоянии  $i$ , спектральные и кинетические свойства которого описываются кинетической функцией Грина  $G_i^{+-}(p)$  (см. обозначения в [15]), где  $p = (\mathbf{p}, \omega)$ . Здесь сплошные линии соответствуют функциям Грина “одетых” частиц, переход в основное состояние  $j$  описывается матричным элементом дипольного момента с проекцией  $l(d_{ij})$ . Рождение фотона с 4-импульсом  $k = (\mathbf{k}, \omega)$  описывается волнистой линией, которой сопоставляется функция Грина поперечного фотона в резонансной среде  $D_{lm}^{+-}(k)$ .

Диаграммы рис. 2 описываются выражениями (см. [15])

$$iM_{em} = \int iG_i^{+-}(p)G_j^{+-}(p-k)d_{ij}^l iD_{lm}^{+-}(k)d_{ij}^m \frac{d^4k}{(2\pi)^4}, \quad (31)$$

$$iM_{abs} = \int iG_i^{+-}(p)G_j^{+-}(p-k)d_{ij}^l iD_{lm}^{+-}(k)d_{ij}^m \frac{d^4k}{(2\pi)^4}.$$

Для фигурирующих в (31) гриновских функций в условиях термодинамического равновесия имеем:

$$iG_i^{+-}(p) = \frac{1}{\exp[(\omega - \mu_a)/T] + 1} a_i(\omega - \omega_i - E(\mathbf{p})), \quad (32)$$

$\mu_a$  – химический потенциал атома,  $a_i(\omega)$  – спектральный профиль  $i$ -го состояния с энергией возбуждения  $\omega_i$  и энергией трансляционного движения  $E(p)$ , постоянная Планка для простоты положена равной единице, числа заполнения атомных состояний  $n_a(\omega)$  в (31) взяты фермиевскими,

$$a_i = \frac{\gamma_i(\omega, \mathbf{p})}{\pi[(\omega - \omega_i - E(\mathbf{p}) - \Delta_i(\omega, \mathbf{p}))^2 + \gamma_i^2(\omega, \mathbf{p})]}, \quad (33)$$

$\gamma_i$  – ширина,  $\Delta_i$  – сдвиг состояния  $i$  за счет взаимодействия атома со средой и излучением (мнимая и

вещественная части запаздывающего оператора,  $\Sigma_i^R(\omega, \mathbf{p})$ , ср. (5);

$$iD_{lm}^{+-}(k) = \left( \delta_{lm} - \frac{k_l k_m}{k^2} \right) (1 + n_R(\omega_k)) \frac{8\pi\omega_k^4 \varepsilon''(\omega_k, \mathbf{k})}{|\omega_k^2 \varepsilon(\omega_k, \mathbf{k}) - c^2 k^2|^2}, \quad (34)$$

$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon'(\omega, \mathbf{k}) + i\varepsilon''(\omega, \mathbf{k})$  – комплексная диэлектрическая проницаемость среды с вещественной  $\varepsilon'(\omega, \mathbf{k})$  и мнимой частью  $\varepsilon''(\omega, \mathbf{k})$ ;  $n_R(\omega_k) = 1/(\exp[\omega_k/T_R] - 1)$  – бозевские числа заполнения для излучения с температурой  $T_R$ , в общем случае, не совпадающей с температурой среды  $T$ .

Из рассмотрения детального баланса процессов испускания и поглощения следует, что в общем случае спектральное распределение атомов является двухтемпературным, с температурами  $T$  и температурой возбуждений  $T_{ex}$  (при равенстве температур излучения  $T_R$  и поступательной температуры  $T$ ):

$$n_i(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\varepsilon + E(p)}{T}\right\} \exp\left\{\frac{\omega_i - \mu_a}{T_{ex}}\right\} + 1}. \quad (35)$$

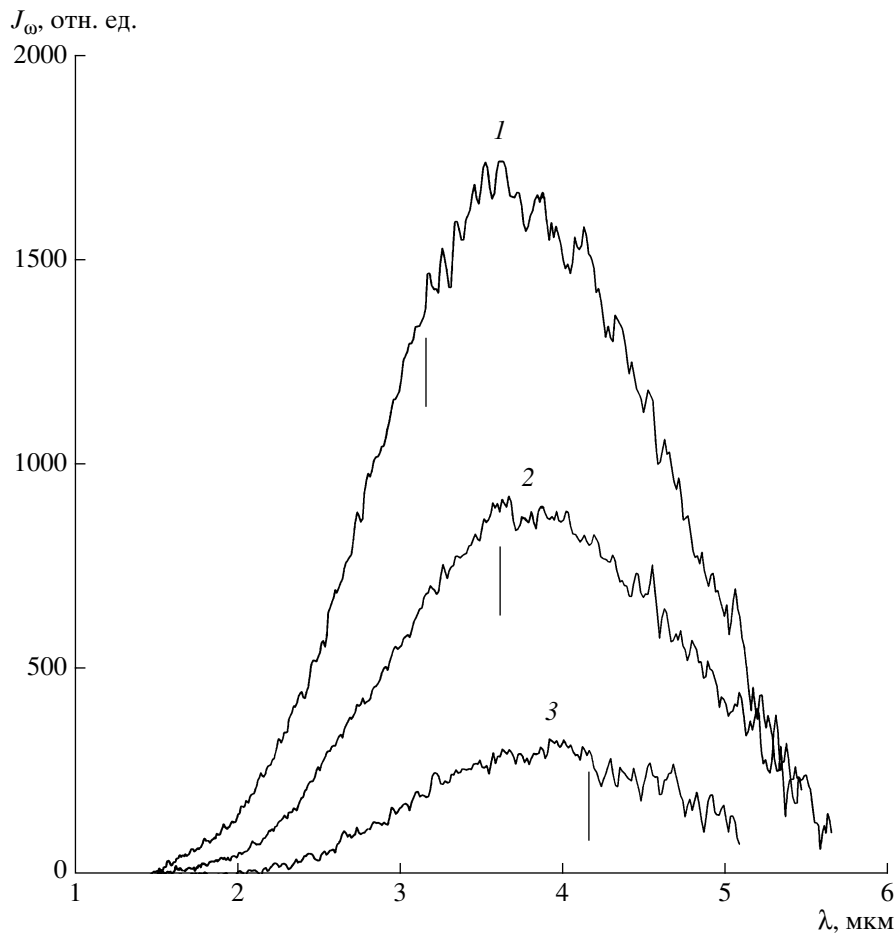
В невырожденном случае ( $\exp[-\mu_a/T_{ex}] \gg 1$ ) с учетом обобщения (35) для скорости излучения атома получим:

$$M_{em}^{i \rightarrow j} \sim N_i^* \exp\left[-\frac{E(\mathbf{p} - \mathbf{k})}{T}\right] \times \exp\left[-\frac{\omega_k - \omega_0}{T}\right] (1 + n_R), \quad (36)$$

где  $N_i^* \sim \exp\left\{-\frac{\omega_i - \mu_a}{T_{ex}}\right\}$  – плотность возбужденных атомов. Для скорости поглощения в этих же обозначениях будем иметь

$$M_{abs}^{j \rightarrow i} \sim \exp\left\{\frac{E(\mathbf{p} - \mathbf{k})}{T}\right\} N_i^* \exp\left\{\frac{\omega_0}{T}\right\} n_R. \quad (37)$$





**Рис. 3.** Спектр теплового свечения паров натрия в ИК области спектра при различных температурах в центре тепловой трубы: 1 –  $T = 1080$  К, 2 –  $950$  К, 3 –  $830$  К. Вертикальными отрезками показаны теоретические положения максимумов.

Если ввести для населенности основного состояния числа заполнения  $N_j^*$ , то  $N_j^* \sim \exp\left\{-\frac{\omega_j - \mu_a}{T_{\text{ex}}}\right\}$ , так что (без учета вырождения)

$$N_j^* / N_i^* = \exp\left\{\frac{\omega_0}{T_{\text{ex}}}\right\}.$$

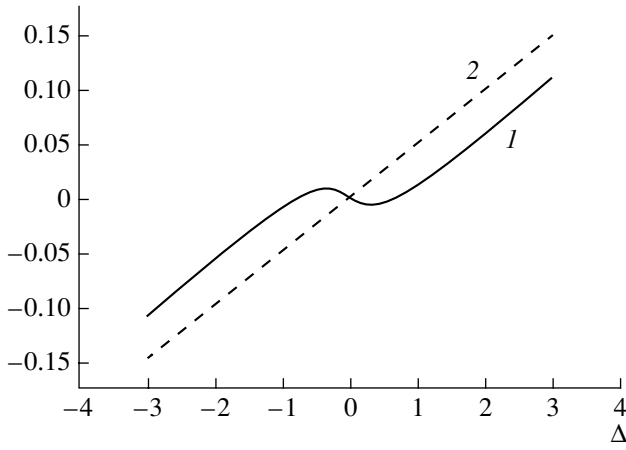
При переходе к стандартным обозначениям и в показателях экспонент в (36)–(37) будет фигурировать постоянная .

### 3. ОБ АСИММЕТРИИ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Из (28) следует, что, строго говоря, даже в равновесии полная эффективная населенность  $\tilde{N}_2$  не будет удовлетворять соотношению Больцмана и

будет совпадать с истинной только в случае узкой линии  $\hbar\Gamma \ll T$ , где  $\Gamma$  – ширина линии.

В случае же широкой линии (подробнее см. [5, 6, 19–21]) интенсивность ее далекого крыла из-за наличия экспоненциального множителя может значительно превышать интенсивность, рассчитанную по стандартной теории, причем большая часть излучаемой в линии энергии может принадлежать именно ее нерезонансному “красному крылу”, а не центральной околорезонансной части (при этом даже возможно возникновение дополнительного низкочастотного максимума в спектре свечения [20, 21]). Действительно, такие максимумы наблюдались нами в экспериментах, в которых изучались спектры чисто теплового свечения нагретых паров натрия в кювете типа “тепловой трубы” при температурах порядка  $800\text{--}1100$  К (см. рис. 3). Отметим, что плотность паров при этих температурах достигает величины  $\sim 8 \times 10^{16}\text{--}4 \times 10^{18}$  см $^{-3}$ . Полученные в экспериментах данные качественно согласуются с результатами численных расчетов излучения, вы-



**Рис. 4.** Асимметрия коэффициента поглощения в единицах средней величины  $\frac{k(\omega_0 - \Delta) - k(\omega_0 + \Delta)}{k(\omega_0 - \Delta) + k(\omega_0 + \Delta)}$  в зависимости от отстройки  $\Delta$  для  $\hbar\omega_0/T = 20$ ,  $\mu/T = -20$ ,  $\gamma_{1/ij} = 3.26 \times 10^{-5}$ ,  $\gamma_{2/T} = 1.81 \times 10^{-3}$ ; для различных значений плотности: 1 –  $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ; 2 –  $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ .

ходящего из неоднородного слоя паров. Более того, в экспериментах также наблюдалась значительная интенсивность излучения в ИК области спектра, на несколько порядков (до четырех порядков величины) превышающая рассчитанную по классической теории и распределенную в видимой области спектра, что также соответствует обобщенной теории переноса излучения [5, 6, 19–21]. В то же время следует отметить, что конкретный механизм поглощения излучения в далеком крыле линии хорошо понятен примерно до 0.7 мкм, где он определяется ван-дер-ваальсовым взаимодействием возбужденного атома натрия с буферным газом (в этой области хорошо коррелирует интенсивность излучения и поляризуемость буферного газа-аргона или гелия). В области порядка 2 мкм вопрос о механизме поглощения пока остается открытым (см. [6]).

В пренебрежении поправками на вынужденное испускание ( $\tilde{N}_i \ll N_j$ ) для коэффициента поглощения в этом пределе можно получить

$$k(\omega) = \frac{2\pi\hbar\omega d^2}{c} \int \frac{dE d\mathbf{p}}{(2\pi)^4} G_i^{+-}(\mathbf{p} + \mathbf{k}) G_j^{-+}(\mathbf{p}). \quad (38)$$

Используя (32), (33) из (38), получим (возвращаясь к стандартным обозначениям)

$$k(\omega) = \hbar \frac{\lambda^2}{4} A_0 \int \frac{dE d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} n(E) (1 - n(E + \hbar\omega)) \times \times a_j(E - \varepsilon_p - E_j) a_i(E - \varepsilon_{\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}} - E_i + \hbar\omega). \quad (39)$$

Для оценок ширины, характеризующих спектральные профили состояний  $i, j$ , воспользуемся оценками типа  $\gamma_j(E, \mathbf{p}) = n\sigma_g(p)/2\sqrt{2E/M}$ . Здесь  $\sigma_g$  – газокинетическое сечение рассеяния, например, с тяжелым буферным газом с плотностью  $n$ ,  $M$  – масса резонансного атома,

$$\begin{aligned} \gamma_i(E + \hbar\omega, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) &= \\ &= \gamma_j(E + \hbar\omega, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) + \frac{\hbar N_p \pi d_{ij}^2}{\hbar |\mathbf{V} + \hbar\mathbf{k}/M|} \sqrt{\frac{2(E + \hbar\omega)}{M}}. \end{aligned} \quad (40)$$

В (40) второе слагаемое описывает дополнительное уширение возбужденного состояния за счет механизма резонансного обмена возбуждением.

На рис. 4 представлен характерный график, характеризующий суммарную асимметрию коэффициента поглощения. Асимметрия обусловлена эффективным резонансом при больших значениях импульса частицы  $\varepsilon_p = (\omega - \omega_0)$ . Кроме того, дополнительную асимметрию вносит зависимость эффективных шириных состояния  $i$  от частоты  $\omega$  (см. (40)).

Авторы благодарят Piero Quarrati за интерес к работе. Один из авторов (А.Н. Старостин) благодарен также Р. Мору и Т. Като за плодотворное сотрудничество. Работа была выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 04-02-16775-а, 03-02-06590 мас, 02-02-17153, грантов Президента Российской Федерации № МК-1565.2003.02, №-338.2003.02, № НШ-1257.2003.2.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kadanoff L.P., Baym G.* QuantumStatistical Mechanics: Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems. N.Y: Benjamin, 1962.
2. *Wigner E.* // Phys.Rev. 1932. V. 40. P. 749.
3. *Галицкий В.М., Якимец В.В.* // ЖЭТФ. 1966. V. 51. P. 957.
4. *Starostin A.N., Mironov A.N., Aleksandrov N.L. et al.* // Physica A. 2002. V. 305. P. 287.
5. *Земцов Ю.К., Сечин А.Ю., Старостин А. Н.* // ЖЭТФ. 1996. Т. 110. С. 1654.
6. *Леонов А.Г., Руденко А.А., Старостин А.Н. и др.* // ЖЭТФ.2002. Т. 122. С. 282.
7. *Арцимович Л.А.* Управляемые термоядерные реакции. М.: Физматгиз, 1961.
8. *Raiola F., Migliardi P., Gyurky G. et al.* // Eur. Phys. J. 2002. V. A13. P. 377.
9. *Raiola F., Migliardi P., Gang P. et al.* // Physics Lett. 2002. V. B547. P. 193.
10. *Starostin A.N., Savchenko V.I., Fish N.J.* // Ibid. 2000.V. A274. P. 64.
11. *Биберман Л.М.* // ЖЭТФ. 1947. Т. 17. С. 416; Holstein T. // Phys. Rev. 1947. Т. 72. С. 1212.

12. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982.
13. Михалас Д. Звездные атмосферы.: Мир, 1982.
14. Келдыш Л.В. // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1515.
15. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
16. Phelps A. JILA Rpt. 110. Boulder, Colorado: Univ. of Colorado, 1972; York G., Gallagher A. JILA Rpt. 114. Boulder, Colorado: Univ. of Colorado, 1974.
17. Holstein T. *Phys. Rev.* 1947. V. 72. P. 1212.
18. Иванов В.В. Перенос излучения и спектры небесных тел. М.: Наука, 1969.
19. Sechin A.Yu., Starostin A.N., Zemtsov Yu.K. et al. // JQSRT. 1997. V. 58. P. 887.
20. Земцов Ю.К., Сечин Ю.А., Старостин А.Н. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 65. С. 807.
21. Земцов Ю.К., Сечин Ю.А., Старостин А.Н. и др. // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 135.